TITLE:
常微分方程式の数値解法における丸め誤差について (大型の数値計算に関する諸問題)

AUTHOR(S):
清水, 辰次郎; 林, 健児; 大橋, 常道

CITATION:
清水, 辰次郎 ...[et al]. 常微分方程式の数値解法における丸め誤差について (大型の数値計算に関する諸問題). 数理解析研究所講究録 1971, 129: 22-34

ISSUE DATE:
1971-11

URL:
http://hdl.handle.net/2433/106561

RIGHT:

京都大学学術情報リポジトリ
KURENAI 紅
Kyoto University Research Information Repository

数理解析研究所講究録
129巻 1971年 22-34

常微分方程式の数値解法における丸め誤差について

東京理科大学　清水辰次郎
林　健児
大橋常道

常微分方程式の数値解法のような複雑な計算となると集積丸め誤差は複雑となり明確な形で研究されたものは極めて少ない。ここでは Discrete Variable Method とよばれる数値解法のうち One step 法に限って論ずる。与えられた微分方程式

(1)　　$y' = f(x, y)$

は　$0 \leq x \leq X_0$, $|y| < \infty$ において初期値 $y(0) = y_0$ をもつ真の解が存在して一意となる様な条件を満足するものとする。

数値解法は次の式とする。

(2)　　$y_{n+1} = y_n + h \cdot \Phi(x_n, y_n : h)$

（これは Dahlquist の意味で収束するものとする。）$y(x_n)$ を(1)の $x = x_n$ における真の解，y_n を(2)の真の解，$\bar{y}_n$ を(2)の実際計算した丸め誤差を含んだ解とする。$\bar{y}_n$ と y_n との関係は

$\bar{y}_n - y(x_n) = \bar{y}_n - y_n + y_n - y(x_n)$．右辺の $y_n - y(x_n)$ は集積打切誤差，$\bar{y}_n - y_n$ が集積丸め誤差であるが，打切誤差の方は

過大評価ではあっても評価式が得られているが丸め誤差の方は満足な評価式も得られていない．普通の書物に固定小数点法の局所丸め誤差として

(3) $\qquad \overline{y}_{n+1} = \overline{y}_n + h \cdot \Phi(x_n, \overline{y}_n : h) + \delta_n$

と示されているが δ_n については説明がなく計算機の最小単位（本論では 10^{-8} ときめよう）の $\frac{1}{2}$ 程度と思われているようである．丸め誤差を考えるにあたって計算方法が問題になるので方式として次の三つを考える．筆算，計算機計算として固定小数点法，浮動小数点法（いずれも十進法とする．）特に筆算の定義は必要であるが省略して口述する．

(3) では筆算でも固定小数点法でも δ_n は決して小さいとは限らない．δ_n は $\Phi(x_n, y_n : h)$ が複雑な場合には大きい場合もあり簡単には定まらない量である．従って上の仮定から出発した集積丸め誤差評価式は正しいとはいわれない。

今浮動小数点法で考えて $\overline{y}_{n+1}$ と $\overline{y}_n$ の関係を

(4) $\qquad \overline{y}_{n+1} = \{\overline{y}_n + h \cdot \Phi(x_n, \overline{y}_n : h)(1+\eta(n))(1+\delta_1(n))\}(1+\delta_2(n))$

とおく．ただし $\eta(n)$ は $\Phi_n \equiv \Phi(x_n, \overline{y}_n : h)$ の計算で生ずる誤差，$\delta_1(n)$ は $h \cdot \Phi_n$ の計算で生ずる誤差，$\delta_2(n)$ は $\overline{y}_n + h \cdot \Phi_n$ の計算で生ずる誤差を表わすことにする．ここで $\overline{y}_n - y_n = r_n$ とおくと (2)，(4) より

(5) $\qquad r_{n+1} = (1 + h \cdot \Phi_y(x_n, \xi_n : h)) r_n + \delta_2(n) \overline{y}_n + h \cdot \Phi_n (\eta(n) + \delta_1(n) + \delta_2(n) + \cdots)$

ここに $\bar{y}_n \le \xi_n \le y_n$ (or $\bar{y}_n \ge \xi_n \ge y_n$), とかける.
この右辺の第2項は(4)の右辺のたし算で生ずる誤差を表わしていると見ることができる. さて(3)は一般には成立しないことは明らかであるが成立するための十分条件は次の様なものである. (3)が成立し $|\delta_n|<10^{-8}$ であるためには

$|\xi_n|, |x_n|$, h 等がすべて 10^{-2} より小でそれらの間で四則演算をやった結果がいつも 10^{-2} より小となることである.(従って演算回数も制限される) 証明は a, b を与えられた数とするとき $\overline{a \pm b} = (a \pm b)(1+\delta)$ で $|\delta| < 10^{-7}$ (浮動小数点法打切の場合) 同様に $\overline{a \cdot b} = a \cdot b(1+\delta)$, $\overline{a/b} = a/b\,(1+\delta)$ である, 一方仮定から $a \pm b$, ab, a/b が 2×10^{-2} より小となり誤差 $(a \pm b)\delta$, $ab\delta$, $\frac{a}{b}\delta$ 等はそれぞれ 10^{-8} より小となる. よってこの様な条件を満足する微分方程式の解の数値解法が行われるときは(3)を使用しても誤はおこらない。

さて一般的な(1)に対する(2)の算法について局所的丸め誤差を求めようとしても一般には求められない. $\Phi(x_n, y_n; h)$ が複雑な式のとき浮動小数点法で現われる誤差は複雑なものとなるのは勿論である. 例えば Φ のうちに除算が入っているときは演算のプログラムは最後まで計算値の見通しをつけて作るわけにはいかないから, 途中で分母にくる式の数値に桁落ちがでて, 零と同じ作用の数が現われるかもしれないから

評価ができない．よって一般の場合に丸め誤差を評価するには $f(x,y)$ を或範囲で多項式にて近似，(1)の解と近似的に近い解をもつ微分方程式について論じなければならない．

（T. Shimizu; Contribution to the Theory of Numerical Integration of Ordinary Differential Equations II [TRU Mathematics vol 4] 1968.）

今与えられた方程式が極めて簡単なものならば次の様な評価式が得られる．（浮動小数点法）．$y'=k\cdot y$，$y'=y^2$，$y'=y/x$ 等の場合どれも同様だから一つについてのみ記す．計算式もEuler法で示す．

$$y'=k\cdot y, \quad y(0)=1/k \quad ．算法 \quad y_{n+1}=y_n+h\cdot k\,y_n$$

η_iを丸め誤差で切捨の場合 $\eta_i<10^{-7}$ とすると

$$\bar{y}_{n+1}=\{\bar{y}_n+h\cdot k\cdot\bar{y}_n(1+\eta_1)(1+\eta_2)\}(1+\eta_3)$$

よって局所的丸め誤差は

$$\bar{y}_n\eta_3+h\cdot k\cdot\bar{y}_n\eta_1+h\cdot k\cdot\bar{y}_n\eta_3+O(\eta^2)$$ となる．これを

$\varphi(n)$と書くと $\bar{y}_{n+1}=\bar{y}_n+h\cdot k\cdot\bar{y}_n+\varphi(n)$ からよく知られた様に $y_0=\bar{y}_0$ として集積丸め誤差 γ_{n+1} は

$$\gamma_{n+1}=(1+h\cdot k\cdot)^n\varphi(0)+(1+h\cdot k)^{n-1}\varphi(1)+\cdots$$
$$\cdots+(1+hk)\varphi(n-1)+\varphi(n)$$

上の様に方程式が簡単な場合，一般に丸め誤差を評価するには次の様に考えればよい；特別な場所を除いては

$|\bar{y}_n| \gg |h \cdot \Phi(x_n, \bar{y}_n : h)|$ と考えられる．かつ(5)において．$\delta_2(n)\bar{y}_n$ に比べて $h \cdot \Phi_n(\eta_1(n) + \delta_1(n) + \delta_2(n) + \cdots)$ は小さいとすると 次式によって error の近似ができる。

(6) $r_{m+1} = (1 + h \cdot \Phi_y(x_n, \bar{y}_n : h))\, r_n + \delta_2(n)\, \bar{y}_n$

ここでは実際に計算して丸め誤差の動向を観察するのが目的である．丸め誤差は微分方程式，その解の初期値，計算方式だけを与えたのでは定まらない．機械の形式の他に式の計算順序を与えて始めて定まる．ここに述べる例からだけでは真の丸め誤差の状態はわかるわけではないが或程度漠然とした知識は得られることと思う．計算方式は四次の Taylor 展開法と四次の Runge-Kutta 法，扱った方程式は次のものである．

$y' = y \quad (y(0) = 1)$，$y' = -y \quad (y(0) = 1)$，$y' = y^2 \quad (y(0) = -1)$

$y' = 4 \cdot \frac{y}{x} \quad (y(\frac{1}{2}) = \frac{1}{16})$，$y' = y - x \quad (y(0) = 1)$，$y' = 1 - y \quad (y(0) = 2)$

$y' = -10y - 10x + 9 \quad (y(0) = 1)$，$y' = -xy \quad (y(0) = 1)$

計算結果の丸め誤差 $\bar{y}_n - y_n$ を調べるために

$\bar{y}_n - y(x_n) = \bar{y}_n - y_n + y_n - y(x_n)$ より $|y_n - y(x_n)| < 10^{-8}$

とする．集積打切誤差の評価が過大であるため h（刻み巾）は非常に小さくなっている，刻み巾 h を一定として 十 ステップ計算する．計算回数を増大したり解の特異性や絶対値の大なところでやれば丸め誤差は増大することは明らかであるがここでは極く普通の場合を目標とした。

計算順序は次の様にする.

Taylor 展開法.

$$y_{n+1} = y_n + h\left(f_n + \frac{h}{2}\left(f'_n + \frac{h}{3}\left(f''_n + \frac{h}{4}\left(f'''_n\right)\right)\right)\right).$$

Runge-Kutta 法.

$$k_1 = f(x_n, y_n), \quad k_2 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1\right)$$

$$k_3 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_2\right), \quad k_4 = f(x_n + h, y_n + h \cdot k_3)$$

を計算し $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$ とする.

計算は10進法8桁, 9桁目以下切捨計算である. Taylor 展開法とR-K法の結果を比較したときその値はほとんど一致しているので計算結果はほとんどが Taylor 法によるものを載せた. これらの例に関しては丸め誤差は (6) 式によって非常に正確に近似出来る. ただし $\delta_2(n)$, $\bar{y}_n$ を切捨られた値として計算する.

尚四捨五入計算による結果も調べたので比較のため最後に載せた。

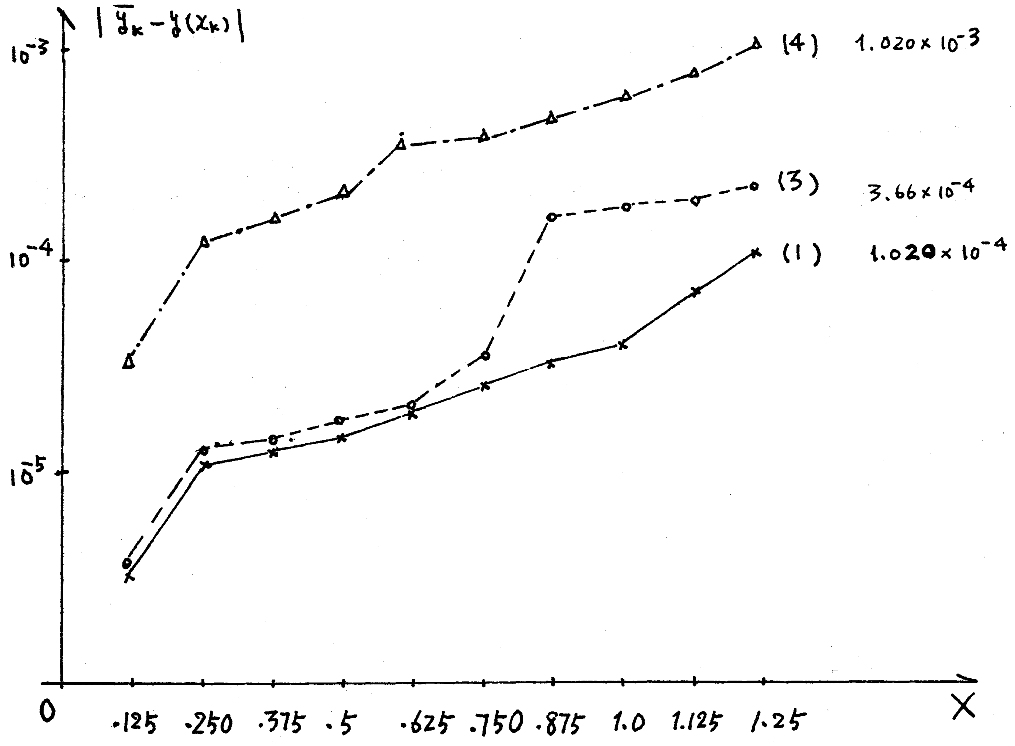
計算結果

① $y' = y$ $[0, 1.25]$ $h = \frac{1}{800}$

初期値	$y(0)=1$			$y(0)=5$		$y(0)=10$	
X	計算値(1)	計算値(2)	真 値	計算値(3)	真 値	計算値(4)	真 値
.250	1.284 0137	1.284 0049	1.284 0254	6.420 1160	6.420 1270	12.84 0137	12.84 0254
.500	1.648 6944	1.648 6687	1.648 7212	8.243 5812	8.243 6060	16.48 6944	16.48 7212
.750	2.116 9541	2.116 8989	2.117 0000	10.58 4938	10.58 5000	21.16 9541	21.17 0000
1.0	2.718 2114	2.718 1087	2.718 2818	13.59 1211	13.59 1409	27.18 2114	27.18 2818
1.25	3.490 2409	3.490 0657	3.490 3429	17.45 1348	17.45 1714	34.90 2409	34.90 3429

注: 計算値(1),(3),(4) は $y_{n+1}=y_n+h(y_n+\frac{h}{2}(y_n+\frac{h}{3}(y_n+\frac{h}{4}y_n)))$ による.

計算値(2) は $y_{n+1}=(1+h(1+\frac{h}{2}(1+\frac{h}{3}(1+\frac{h}{4}))))^{n+1}$ による.



② $y' = -y$ $y(0)=1$ $[0, 2]$ $h = \frac{1}{500}$

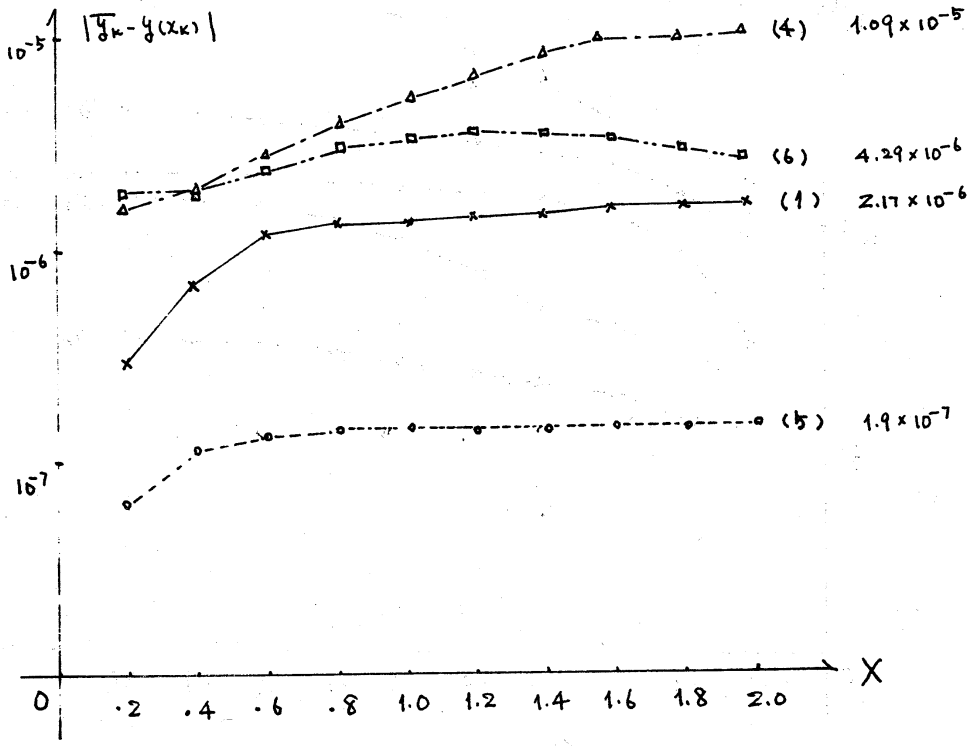
X	hによる計算(1)	hによる計算(2)	$h/2$ (3)	$h/5$ (4)	$10h$ (5)	$100h$ (6)	真値
.4	.6703 2087	.6703 1857	.6703 2164	.6703 2431	.6703 2017	.6703 2433	.6703 2004
.8	.4493 3031	.4493 2640	.4493 3176	.4493 3589	.4493 2911	.4493 3468	.4493 2896
1.2	.3011 9596	.3011 9086	.3011 9780	.3012 0302	.3011 9437	.3011 9994	.3011 9421
1.6	.2018 9852	.2018 9267	.2019 0056	.2019 0655	.2018 9670	.2019 0163	.2018 9651
2.0	.1353 3745	.1353 3019	.1353 3962	.1353 4618	.1353 3547	.1353 3957	.1353 3528

注: 計算値 (1),(3),(4),(5),(6) は $y_{n+1} = y_n + h(-y_n + \frac{h}{2}(y_n + \frac{h}{3}(-y_n + \frac{h}{4}y_n)))$ による.

計算値 (2) は $y_{n+1} = (1 - h - \frac{h^3}{6})y_n + \frac{h^2}{2}(1 + \frac{h^2}{12})y_n$ による.

上の他に 2h, 5h による計算もあるが省略する.

10h, 100h による計算では計算値と真値との差は丸めの誤差のみであるという保障はない.

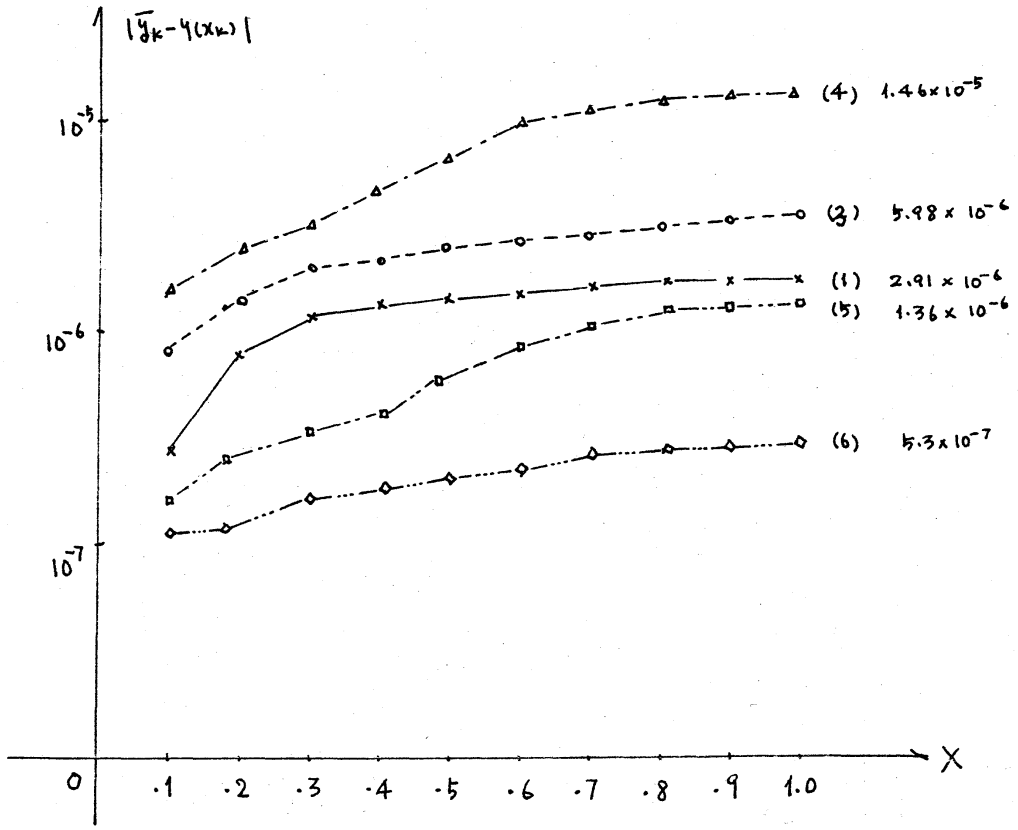


③ $y' = y^2$　$y(0) = -1$　$[0, 1]$　$h = 1/1000$

刻み幅 X	h (1)	h (2)	$h/2$ (3)	$h/5$ (4)	$2h$ (5)	$5h$ (6)	真値
.2	-.8333 3422	-.8333 3423	-.8333 3505	-.8333 3745	-.8333 3377	-.8333 3349	-.8333 3333
.4	-.7142 8717	-.7142 8717	-.7142 8876	-.7142 9304	-.7142 8645	-.7142 8599	-.7142 8571
.6	-.6250 0198	-.6250 0198	-.6250 0412	-.6250 0999	-.6250 0095	-.6250 0038	-.6250 0000
.8	-.5555 5805	-.5555 5805	-.5555 6066	-.5555 6793	-.5555 5670	-.5555 5603	-.5555 5555
1.0	-.5000 0291	-.5000 0291	-.5000 0598	-.5000 1460	-.5000 0136	-.5000 0053	-.5000 0000

注：計算値 (1),(3),(4),(5),(6) は $y_{n+1} = y_n + y_n^2 \cdot h(1 + y_n \cdot h(1 + y_n \cdot h(1 + y_n h)))$ による.

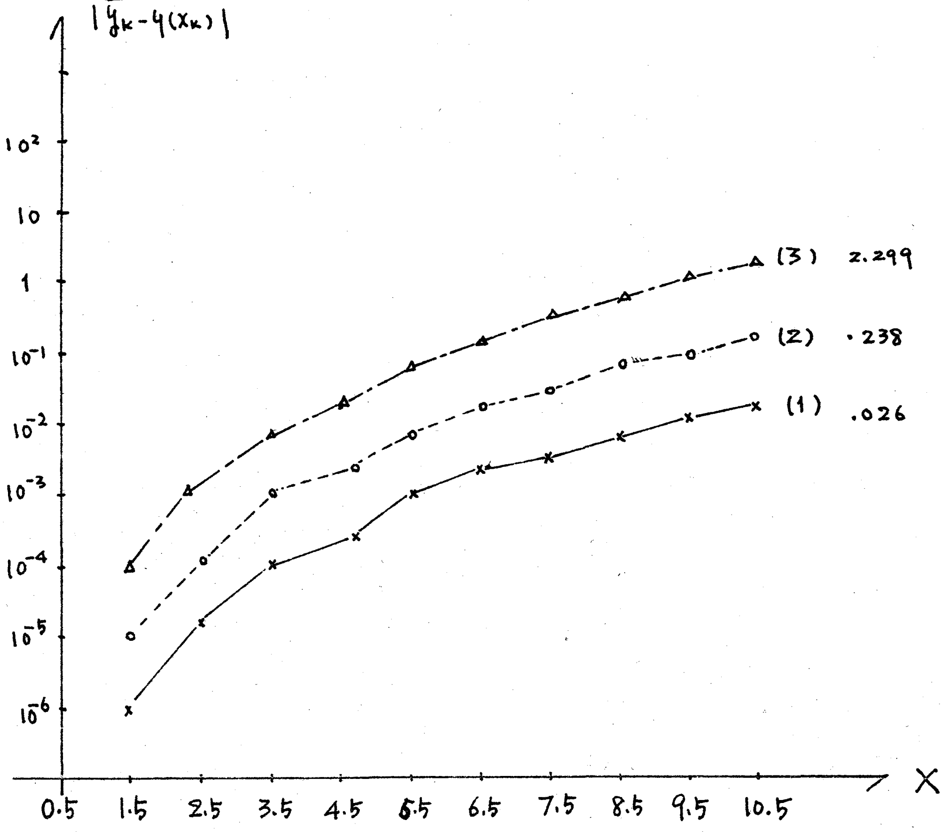
計算値 (2) は $y_{n+1} = y_n + h(f_n + \frac{h}{2}(f_n' + \frac{h}{3}(f_n'' + \frac{h}{4} f_n''')))$ による.



④ $y' = 4 \cdot \frac{y}{x}$ $y(\frac{1}{2}) = \frac{1}{16}$ [.5 , 10.5]

X \ 刻み幅	$h=\frac{1}{10}$ (1)	$h=\frac{1}{100}$ (2)	$h=\frac{1}{1000}$ (3)	真値
2.5	$.3906\ 2479 \times 10^{2}$	$.3906\ 2331 \times 10^{2}$	$.3906\ 0926 \times 10^{2}$	$.3906\ 2500 \times 10^{2}$
4.5	$.4100\ 6209 \times 10^{3}$	$.4100\ 5911 \times 10^{3}$	$.4100\ 2950 \times 10^{3}$	$.4100\ 6250 \times 10^{3}$
6.5	$.1785\ 0600 \times 10^{4}$	$.1785\ 0392 \times 10^{4}$	$.1784\ 8445 \times 10^{4}$	$.1785\ 0625 \times 10^{4}$
8.5	$.5220\ 0533 \times 10^{4}$	$.5219\ 9773 \times 10^{4}$	$.5219\ 2483 \times 10^{4}$	$.5220\ 0625 \times 10^{4}$
10.5	$.1215\ 5036 \times 10^{5}$	$.1215\ 4824 \times 10^{5}$	$.1215\ 2763 \times 10^{5}$	$.1215\ 5062 \times 10^{5}$

注: Taylor 法による計算 $y_{m+1} = y_n + h(f_n + \frac{h}{2}(f'_n + \frac{h}{3}(f''_n + \frac{h}{4} f'''_n)))$ では打切誤差は 0 である.



⑤ $y' = y - x$ $y(0)=1$ $[0, 2]$ $h = 1/500$

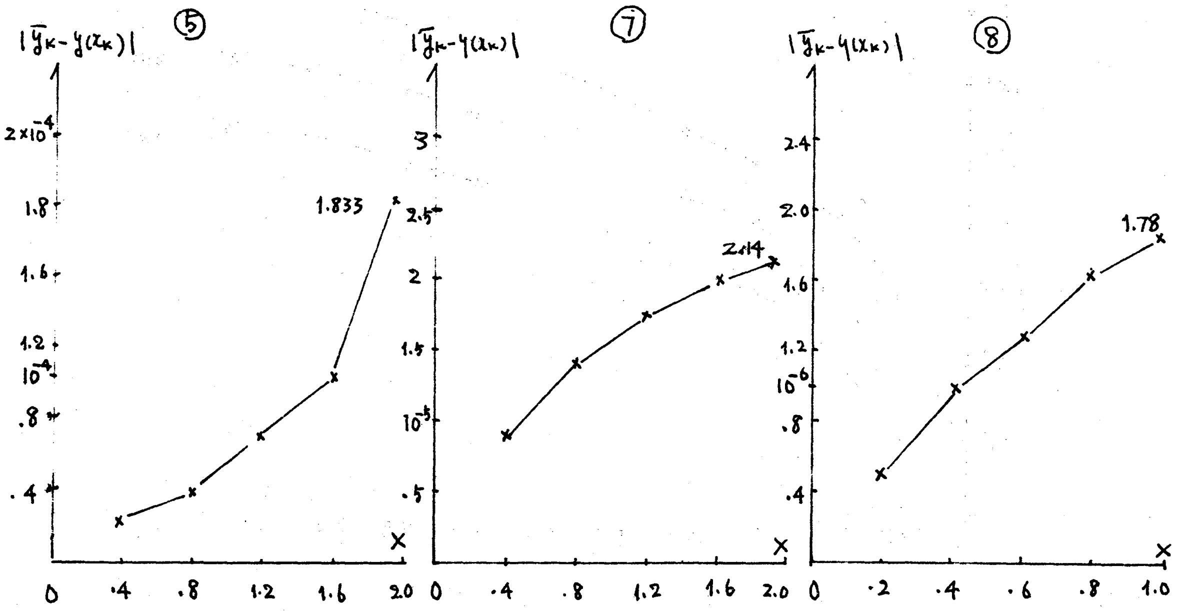
⑥ $y' = -10y - 10x + 9$ $y(0)=1$ $[0, .2]$ $h = 1/5000$

⑦ $y' = 1 - y$ $y(0) = 2$ $[0, 2]$ $h = 1/500$

⑧ $y' = -xy$ $y(0)=1$ $[0, 1]$ $h = 1/500$

	⑤			⑦			⑧	
X	計算値	真値		計算値	真値		計算値	真値
.4	1.399 9800	1.400 0000	.4	1.670 3290	1.670 3200	.2	.9801 9927	.9801 9867
.8	1.799 9600	1.800 0000	.8	1.449 3435	1.449 3289	.4	.9231 1738	.9231 1634
1.2	2.199 9300	2.200 0000	1.2	1.301 2120	1.301 1942	.6	.8352 7159	.8352 7020
1.6	2.599 8850	2.600 0000	1.6	1.201 9165	1.201 8965	.8	.7261 5067	.7161 4903
2.0	2.999 8167	3.000 0000	2.0	1.135 3568	1.135 3352	1.0	.6065 3243	.6065 3065

注：⑧のみ500 step. ⑥についてはTaylor法, R-K法による計算は共に真値と一致している. ⑤における計算値はR-K法による. ⑦,⑧はTaylor法による.



＜四捨五入計算の結果＞

① $y' = y \quad y(0) = 1 \quad [0, 1.25] \quad h = 1/800$

X	$\bar{y}_k$ (切捨)	$\bar{y}_k$ (四捨五入)	真値
.250	1.284 0137	1.284 0259	1.284 0254
.500	1.648 6944	1.648 7222	1.648 7212
.750	2.116 9541	2.117 0005	2.117 0000
1.000	2.718 2114	2.718 2821	2.718 2818
1.250	3.490 2409	3.490 3434	3.490 3429

② $y' = -y \quad y(0) = 1 \quad [0, 2] \quad h = 1/500$

X	$\bar{y}_k$ (切捨)	$\bar{y}_k$ (四捨五入)	真値
.4	.6703 2087	.6703 2003	.6703 2004
.8	.4493 3031	.4493 2895	.4493 2896
1.2	.3011 9596	.3011 9420	.3011 9421
1.6	.2018 9852	.2018 9652	.2018 9651
2.0	.1353 3745	.1353 3524	.1353 3528

③ $y'=y^2$　　$y(0)=-1$　　$[0,\ 1]$　　$h=1/1000$

x	$\bar{y}_k$(切捨)	$\bar{y}_k$(四捨五入)	真値
.2	−.8333 3422	−.8333 3338	−.8333 3333
.4	−.7142 8717	−.7142 8581	−.7142 8571
.6	−.6250 0198	−.6250 0009	−.6250 0000
.8	−.5555 5805	−.5555 5560	−.5555 5555
1.0	−.5000 0291	−.5000 0002	−.5000 0000

④ $y'=4\cdot\frac{y}{x}$　　$y(\frac{1}{2})=\frac{1}{16}$　　$[.5,\ 10.5]$　　$h=1/100$

x	$\bar{y}_k$(切捨)	$\bar{y}_k$(四捨五入)	真値
2.5	$.3906\ 2331\times10^2$	$.3906\ 2511\times10^2$	$.3906\ 2500\times10^2$
4.5	$.4100\ 5911\times10^3$	$.4100\ 6256\times10^3$	$.4100\ 6250\times10^3$
6.5	$.1785\ 0392\times10^4$	$.1785\ 0631\times10^4$	$.1785\ 0625\times10^4$
8.5	$.5219\ 9773\times10^4$	$.5220\ 0630\times10^4$	$.5220\ 0625\times10^4$
10.5	$.1215\ 4824\times10^5$	$.1215\ 5063\times10^5$	$.1215\ 5062\times10^5$

注：計算は全てIBM 1620による。